

MQI: Cours 5

**Systemes à deux états
(ou à deux niveaux)**

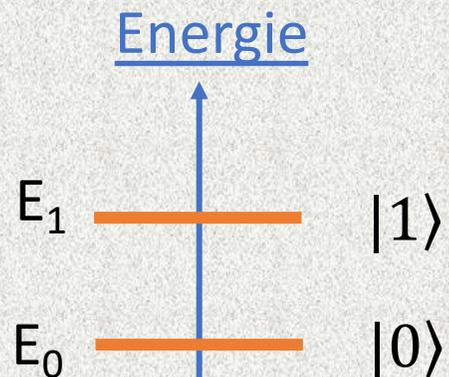
Introduction

Contexte: Il existe un grand nombre de « systèmes modèles » quantiques, ou « d'observables quantiques fondamentales » qui se décrivent grâce à des « espaces d'états » de dimension 2. On les appelle « systèmes à deux états » ou « systèmes à deux niveaux ».

Exemples « fondamentaux »: polarisation du photon, « spin de l'électron » (voir plus loin),
Physique des particules: « oscillations » des neutrinos, « oscillations » des « kaons neutres »,...

Exemples de systèmes « modèles »:

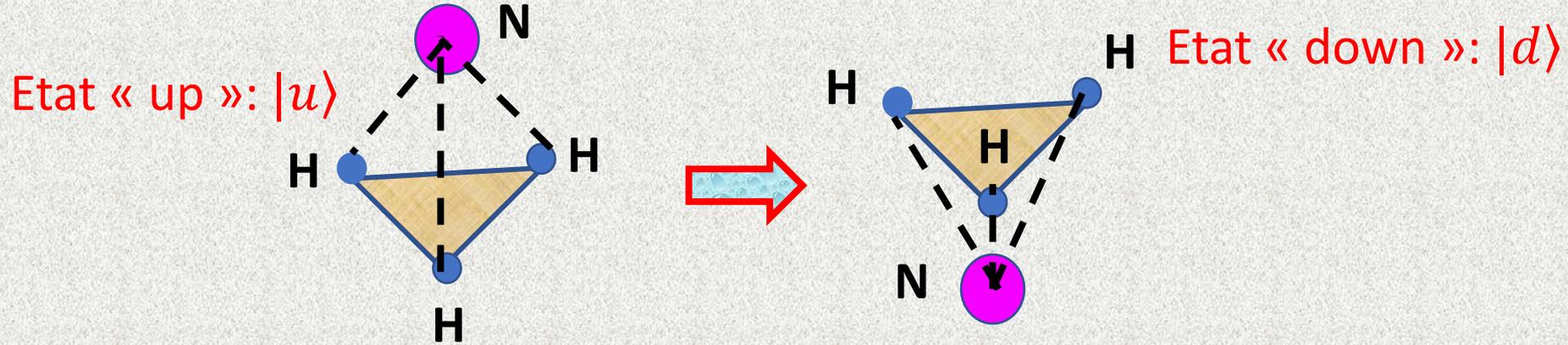
♦ Modèle d'atome (l'atome « à deux niveaux »)



Etat quelconque $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

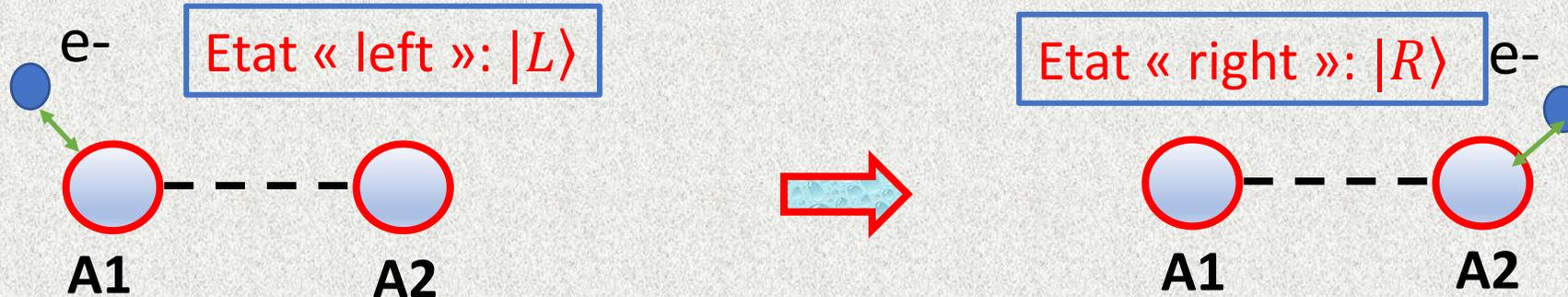
Systemes « modèles »: exemples

◆ Modèle de la molécule d'ammoniac (NH_3)



Etat quelconque $|\psi\rangle = \alpha|u\rangle + \beta|d\rangle$

◆ Modèle de liaison moléculaire (système de deux atomes A1 et A2 et un électron)



Etat quelconque $|\psi\rangle = \alpha|L\rangle + \beta|R\rangle$

Systemes à deux états

Les observables
et
leurs propriétés mathématiques

Les observables d'un système « à deux états »

◆ L'espace de Hilbert \mathcal{H} est constitué des états $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ où $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ est une base orthonormée.

◆ Les opérateurs \hat{A} hermitiens sont représentés dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ par des matrices $[\hat{A}] = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$ telles que $[\hat{A}] = [\hat{A}]^\dagger \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{pmatrix} \Rightarrow a, d \in \mathbb{R}, c = b^*$,

Donc $[\hat{A}] = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & d \end{pmatrix}$, avec $a, d \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{C}$.

En notations de Dirac: $\hat{A} = a|0\rangle\langle 0| + b|1\rangle\langle 0| + b^*|0\rangle\langle 1| + d|1\rangle\langle 1|$.

◆ Si on pose $\alpha = \frac{a+d}{2}$, $\beta = \frac{a-d}{2}$, $b = \gamma + i\delta$, avec $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$:

$$[\hat{A}] = \alpha I_{\mathcal{H}} + \gamma \sigma_1 + \delta \sigma_2 + \beta \sigma_3$$

Avec:

$$I_{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Les $\{\sigma_i\}_{i=1,2,3}$ sont des opérateurs hermitiens appelés « **matrices de Pauli** ».

Propriétés des Matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- ◆ $\forall i, \sigma_i^\dagger = \sigma_i$ et $\sigma_i^2 = I_{\mathcal{H}}$; $\forall i \neq j, \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i$,
- ◆ $\sigma_1 \sigma_2 = i\sigma_3, \sigma_2 \sigma_3 = i\sigma_1, \sigma_3 \sigma_1 = i\sigma_2$

◆ On peut résumer ces propriétés par: $\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} I_{\mathcal{H}} + i \sum_{\ell} \varepsilon_{j k \ell} \sigma_{\ell}$
où $\varepsilon_{j k \ell}$ est le « symbole de Levi-Civita »:

$\varepsilon_{j k \ell}$ est complètement antisymétrique en $j k \ell$ et $\varepsilon_{123} = 1$.

On retrouvera les matrices de Pauli avec le « spin de l'électron ».

Valeurs propres et vecteurs propres (1)

Observable $[\hat{A}] = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & d \end{pmatrix}$, avec $a, d \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{C}$ dans la base orthonormée $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

◆ **Valeurs propres** données par $\det(\hat{A} - \lambda I_{\mathcal{H}}) = 0 \Leftrightarrow (a - \lambda)(d - \lambda) - |b|^2 = 0$



$$\lambda_{\pm} = \frac{a+d}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(a-d)^2 + 4|b|^2}$$

◆ **Vecteurs propres**: on cherche $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ tel que $\hat{A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$.

Attention: les deux équations obtenues sont équivalentes: on ne peut pas déterminer à la fois x et y . En effet si $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ est solution $\alpha \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ est aussi solution.

Si $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ est solution, on peut « normaliser » le vecteur en prenant $\alpha = (|x|^2 + |y|^2)^{-1/2}$.

Voir diapo suivante

Valeurs propres et vecteurs propres (2)

Observable $[\hat{A}] = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & d \end{pmatrix}$, avec $a, d \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{C}$ dans la base orthonormée $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$\lambda_{\pm} = \frac{a+d}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(a-d)^2 + 4|b|^2}$$

◆ On cherche les vecteurs (normalisés) $|\pm\rangle$ tels que $\hat{A}|\pm\rangle = \lambda_{\pm}|\pm\rangle$

◆ Si l'on pose $b = |b|e^{i\varphi}$ et $\text{tg}(\theta) = 2|b|/(d-a)$ (si $d = a$, $\theta = \pi/2$), on montre que les **vecteurs propres normalisés** peuvent s'écrire de façon générale:

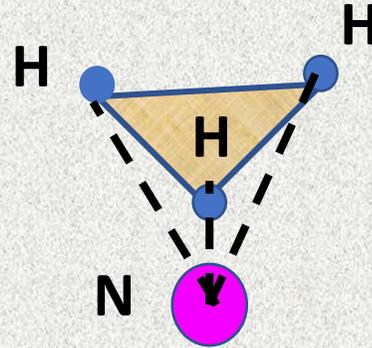
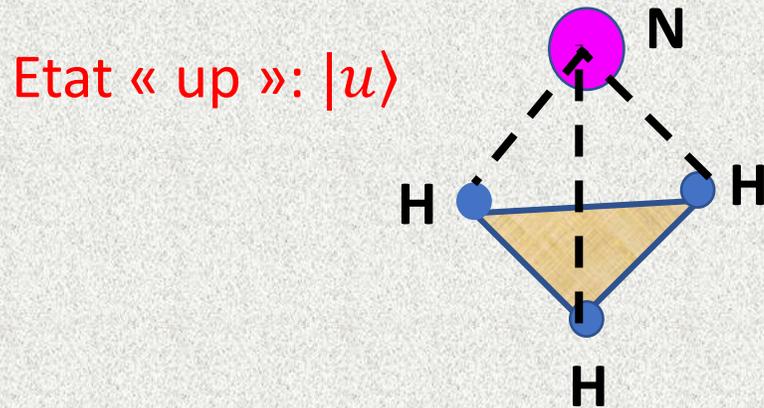
$$|+\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}|1\rangle \quad \text{et} \quad |-\rangle = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle - \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}|1\rangle$$

Remarque: en pratique il faut refaire le calcul des valeurs propres et vecteurs propres à chaque fois.

Exemple de système « modèle »

La molécule d'ammoniac
et
ses « oscillations »

Exemple: la molécule d'ammoniac (1)



Base orthonormée $\{|u\rangle, |d\rangle\}$

L'Hamiltonien

- ◆ **Premier modèle** (ordre 0): $\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}$ soit: $\hat{H}_0|u\rangle = E_0|u\rangle$ et $\hat{H}_0|d\rangle = E_0|d\rangle$,
(Même valeur propre E_0 car les deux configurations sont symétriques).

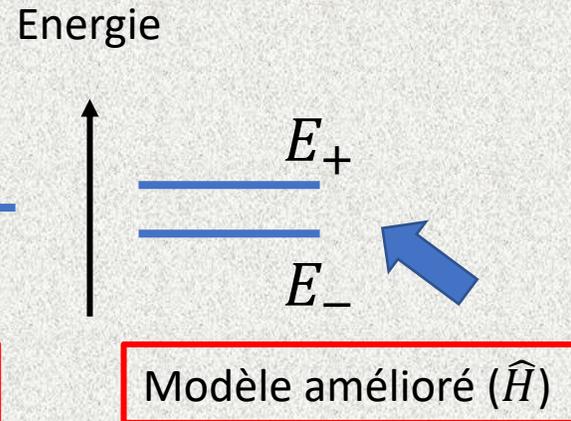
- ◆ **Deuxième modèle** (ordre 1): on « autorise » l'atome d'azote à passer par « effet tunnel » à travers le plan des hydrogènes en introduisant le paramètre $W > 0$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \begin{pmatrix} 0 & W \\ W & 0 \end{pmatrix} \text{ donc } \langle u|\hat{H}|d\rangle = \langle d|\hat{H}|u\rangle = -W, \quad W > 0$$

L'Hamiltonien n'est plus « diagonal » dans la base $\{|u\rangle, |d\rangle\}$.

Exemple: la molécule d'ammoniac (2)

Energies propres E_{\pm} et états propres $|\pm\rangle$ de l'Hamiltonien \hat{H}



$$E_{\pm} = E_0 \pm W \text{ et } |\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u\rangle \mp |d\rangle)$$

E_- et $|-\rangle$: Niveau d'énergie et état **fondamentaux** (« le plus bas niveau »).

Dans les états propres de l'Hamiltonien $|\pm\rangle$, la probabilité de trouver l'azote dans la position « up » ou « down » est donnée par:

$$P_{up} = |\langle u|\pm\rangle|^2 = \frac{1}{2} \text{ et } P_{down} = |\langle d|\pm\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

On dit que l'atome d'azote est **délocalisé**.

Exemple: la molécule d'ammoniac (3)

Dynamique et « oscillations »

Position du problème: Si à l'instant initial l'état est $|\psi(t=0)\rangle = |u\rangle$, quel est l'état $|\psi(t)\rangle$?
Quelle est la probabilité $P_d(t)$ de trouver le système dans l'état $|d\rangle$ à l'instant « t » ?

Méthode pour trouver $|\psi(t)\rangle$



Ecrire $|\psi(t=0)\rangle$ dans la base propre de l'Hamiltonien .

$$|\psi(t=0)\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$



$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t} |+\rangle + \beta e^{-\frac{i}{\hbar}E_- t} |-\rangle$$

$$\alpha = \langle +|\psi(t=0)\rangle = \langle +|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle u| - \langle d|)|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\beta = \langle -|\psi(t=0)\rangle = \langle -|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle u| + \langle d|)|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$



$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t} |+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_- t} |-\rangle \right)$$

Exemple: la molécule d'ammoniac (4)

Dynamique et « oscillations »

On peut réécrire $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} E_+ t} |+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} |-\rangle \right)$ dans la base d'origine $\{|u\rangle, |d\rangle\}$ en utilisant le fait que $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u\rangle \mp |d\rangle)$. On obtient (en tenant compte de $E_{\pm} = E_0 \pm W$):

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left(\cos \frac{Wt}{\hbar} |u\rangle + i \sin \frac{Wt}{\hbar} |d\rangle \right)$$

Donc la probabilité $P_d(t)$ de trouver le système dans l'état $|d\rangle$ à l'instant « t » est donnée par:

$$P_d(t) = |\langle d|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2 \frac{Wt}{\hbar} = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2Wt}{\hbar} \right)$$

La probabilité $P_d(t)$ **oscille périodiquement au cours du temps entre 0 et 1** avec la pulsation

$$\omega = \frac{2W}{\hbar}.$$

Exemple: la molécule d'ammoniac (5)

Dynamique et « oscillations »

Conclusion

Si l'atome d'azote se trouve dans l'état « up » à l'instant initial, la probabilité de le trouver dans l'état « down » à l'instant « t » est donnée par:

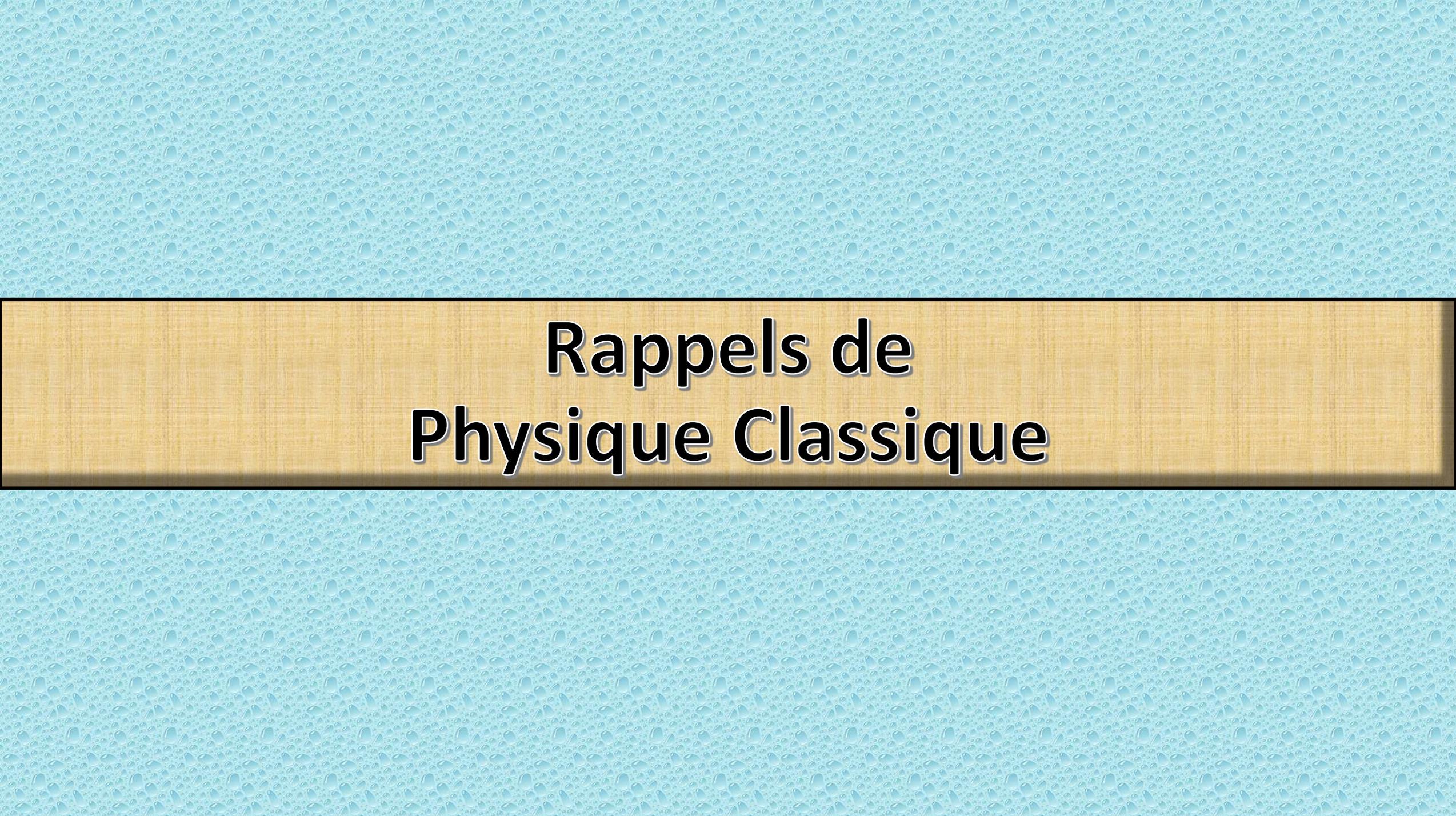
$$P_d(t) = \sin^2 \frac{Wt}{\hbar}$$

Il en résulte que périodiquement, aux instants $t_n = \frac{\hbar}{2W} \left(n + \frac{1}{2} \right)$, on est **certain** de trouver l'atome d'azote dans l'état « down » ($P_d(t_n) = 1$).

Remarque: L'oscillation de l'atome d'azote et l'existence des deux niveaux d'énergie E_{\pm} entraîne la possibilité pour la molécule d'ammoniac **d'absorber et d'émettre des photons d'énergie $E = \hbar\omega = E_+ - E_- = 2W$** . Ceci est à la base du fonctionnement du « **MASER à ammoniac** », un des premiers systèmes expérimentaux mettant en œuvre le principe d'émission cohérente, mais dans le domaine des « Micro-waves ».

Exemple « fondamental »

**Le spin de l'électron
(une introduction)**



Rappels de Physique Classique

Rappels de Physique Classique (1)

Le « moment cinétique intrinsèque » ou « spin »

- ◆ La « quantité de mouvement » ou « impulsion » \vec{p} d'un objet mesure « la capacité de l'objet à avoir un mouvement de translation » dans l'espace,
- ◆ Le « moment cinétique » mesure « la capacité de l'objet à avoir un mouvement de rotation ». Mais deux types de rotations peuvent exister:
 - Les rotations par rapport à un référentiel fixe extérieur:
 - => cela conduit à la définition du « **moment cinétique orbital** » noté \vec{L} ,
 - Les rotations de l'objet « sur lui-même » :
 - => cela conduit à la définition du « **moment cinétique intrinsèque** » (ou spin) noté \vec{S}

Il est conventionnel en Mécanique Classique de **supposer** qu'un « point matériel » a une **masse m** , une **quantité de mouvement \vec{p}** , un **moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$** , **mais pas de moment cinétique intrinsèque** => Il s'agit d'un **A PRIORI sans justification**.

Exemple: A l'échelle du système solaire, Jupiter est un « point matériel », pourtant Jupiter tourne bien sur elle-même, et vu sa masse son « spin » est loin d'être négligeable.

Rappels de Physique Classique (2)

Spin, Moment magnétique, Interaction avec un champ magnétique

◆ On montre qu'un « objet » ayant un **moment cinétique intrinsèque** (ou spin) \vec{S} et ayant des propriétés électromagnétiques a automatiquement un **moment magnétique** \vec{M} tel que $\vec{M} = \gamma \vec{S}$ où γ est appelé « **facteur gyromagnétique** ».

◆ Un « point matériel » situé en \vec{r}_M qui (a) possède un **moment magnétique** \vec{M} , et qui (b) est soumis à un **champ magnétique** $\vec{B}(\vec{r})$, possède alors une **énergie** $U(\vec{r}_M) = -\vec{M} \cdot \vec{B}(\vec{r}_M)$.

◆ Ce « point matériel » est donc soumis à une force $\vec{F} = -\vec{\nabla}U = \vec{\nabla}(\vec{M} \cdot \vec{B})$.

◆ Si le point matériel a un « spin » \vec{S} et un facteur gyromagnétique γ , et qu'il est soumis à un champ $\vec{B}(\vec{r})$, il « voit » donc une force $\vec{F} = \gamma \vec{\nabla}(\vec{S} \cdot \vec{B})$.

On peut **mesurer le spin** (au moins une composante) en faisant interagir l'objet avec un **gradient de champ magnétique** et en regardant le déplacement de l'objet:
c'est l'expérience de Stern et Gerlach.

Description du « spin » (quantique) de l'électron

Les observables de « spin » de l'électron (1)

Contexte: les « particules élémentaires » sont supposées assimilables à des **points matériels**, mais elles ont un « spin ». De plus **ces objets sont « quantiques »**, c'est-à-dire que leur « spin » a des propriétés « très étranges ». L'électron en est l'illustration parfaite.

◆ Le spin $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ de l'électron est représenté par trois opérateurs hermitiens $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ agissant sur un espace des états \mathcal{H} de dimension 2.

◆ Les trois opérateurs $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ ont **les mêmes valeurs propres** qui sont $\pm \frac{\hbar}{2}$ (on peut vérifier que la constante \hbar a bien la dimension d'un moment cinétique),

◆ **Dans la base $|\pm\rangle$ qui diagonalise \hat{S}_z** (soit $\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$) on a les matrices:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Remarque: on retrouve les matrices de Pauli.

Les observables de « spin » de l'électron (2)

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Conséquences



- ◆ Les trois opérateurs $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ ne commutent pas entre eux et vérifient:
$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x, [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$
- ◆ On en déduit qu'un **seul des trois opérateurs** peut avoir une **valeur bien définie** (une valeur propre) à un instant donné => le « **vecteur \vec{S} au sens classique** » (constitué de trois composantes ayant des valeurs bien définies) **N'EXISTE PAS**.

- ◆ Mais la « norme » du vecteur est bien définie car $\vec{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 I_{\mathcal{H}}$.

La mise en évidence des propriétés quantiques (quantification des valeurs mesurables) du « spin » de l'électron a été obtenue par Stern et Gerlach (voir ci-après)



Les observables de « spin » de l'électron (3)

Hamiltonien d'interaction spin-champ magnétique

◆ L'électron a un **moment magnétique** (quantique) $\vec{M} = \gamma \vec{S}$ avec $\gamma = g \frac{q_e}{2m}$ où m et q_e sont la masse et la charge de l'électron et où « g » est un **nombre sans dimension** tel que $g \cong 2$. Le « $g - 2$ » est une des quantités fondamentales les mieux connues.

Remarque: $\gamma < 0$ car $q_e < 0$.

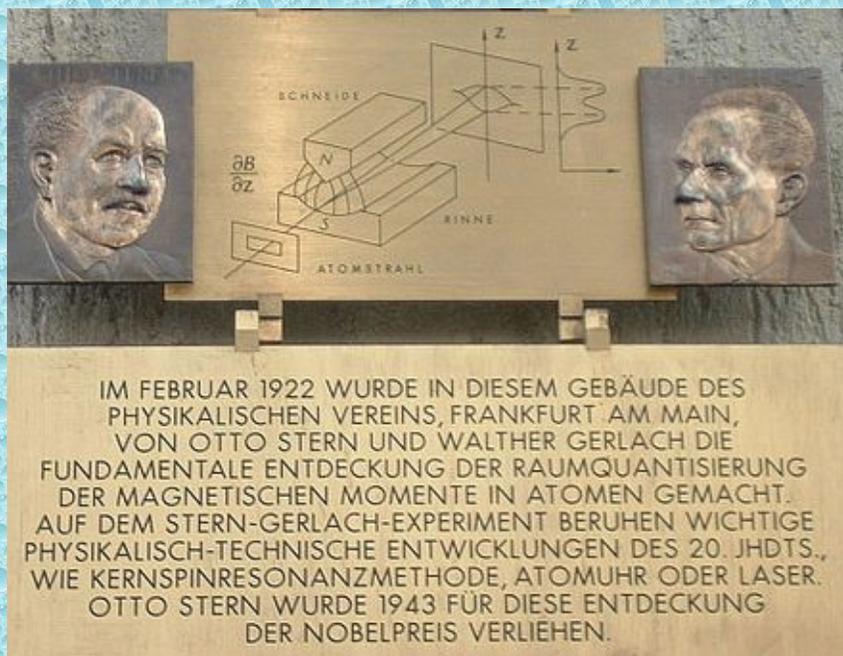
◆ Un électron placé dans un **champ magnétique** \vec{B} possède un « **Hamiltonien d'interaction** »

$$\hat{H} = -\vec{M} \cdot \vec{B}$$

◆ Si le champ \vec{B} est orienté selon Oz avec $\vec{B} = B(z)\vec{u}_z$, alors $\hat{H} = -\gamma B(z)\hat{S}_z$. Or \hat{S}_z a pour valeurs propres $\pm \frac{\hbar}{2}$, donc les énergies possibles sont $E_{\pm}(z) = \mp \frac{\gamma\hbar}{2} B(z)$.

Conclusion: Selon que l'électron est dans l'état $+\frac{\hbar}{2}$ ou $-\frac{\hbar}{2}$, il verra une force $\vec{F}_+ = -\frac{dE_+}{dz}\vec{u}_z$ ou $\vec{F}_- = -\frac{dE_-}{dz}\vec{u}_z$. Or \vec{F}_+ et \vec{F}_- opposées => Séparation des électrons en « **deux paquets** »

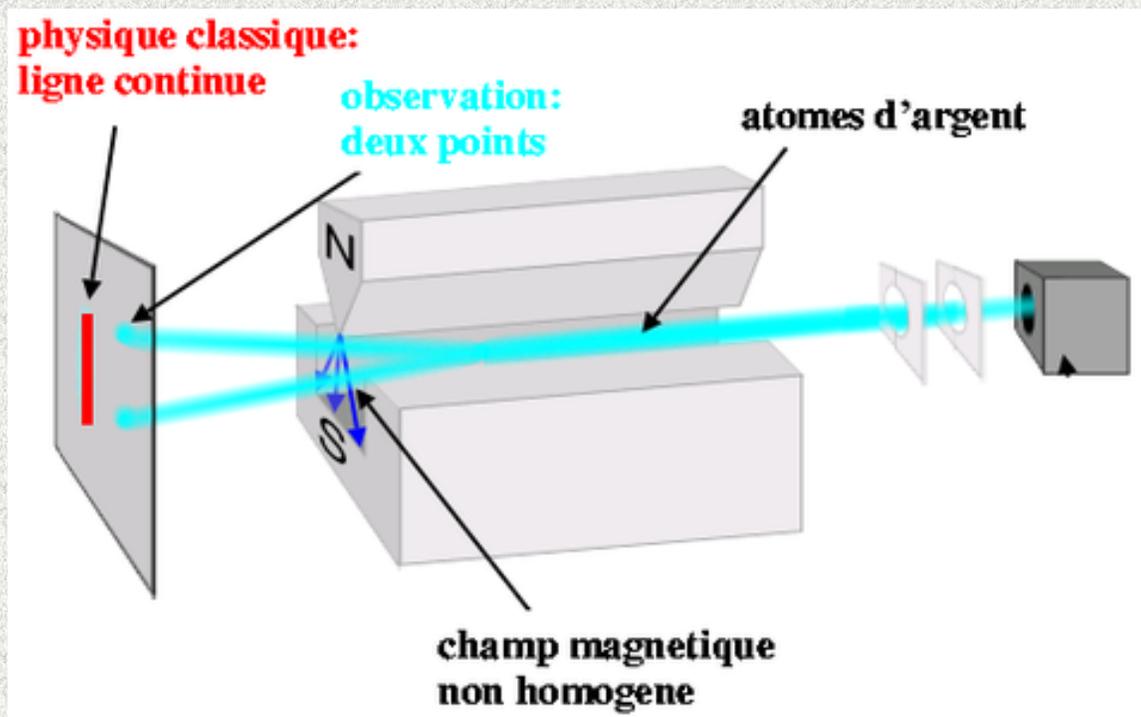
L'expérience de Stern et Gerlach



Plaque commémorative de l'expérience portant l'effigie des deux physiciens au siège de la *Physikalische Verein* à [Francfort-sur-le-Main](#) (source Wikipedia)

L'expérience de Stern et Gerlach

◆ L'expérience de Stern et Gerlach « originelle » (1922) a été effectuée avec des atomes d'argent, et pas des électrons. Mais on peut montrer que le spin d'un atome d'argent est le même que celui d'un seul électron => Mise en évidence de la « **quantification du spin** ».



On observe sur l'écran de détection « **deux taches** » bien séparées au lieu d'une ligne continue prédite par la physique classique (pas de quantification). On obtient la preuve que le « spin est quantifié ».